

## Simulació de Processos Químics

2012/2013

Codi: 102444  
Crèdits ECTS: 3

Titulació	Pla	Tipus	Curs	Semestre
2500897 Graduat en Enginyeria Química	951 Graduat en Enginyeria Química	OB	3	2

### Professor de contacte

Nom: Antoni Sánchez Ferrer  
Correu electrònic: Antoni.Sanchez@uab.cat

### Utilització d'idiomes

Llengua vehicular majoritària: català (cat)  
Algun grup íntegre en anglès: No  
Algun grup íntegre en català: Sí  
Algun grup íntegre en espanyol: No

### Prerequisits

No n'hi ha.

Es recomana haver cursat les següents assignatures:

- Reactors químics
- Transmissió de calor
- Operacions de separació
- Cinètica química
- Aplicacions informàtiques

### Objectius

1. Reforçar les bases que governen els principals processos de l'Enginyeria Química: balanços de matèria i energia en estat estacionari i no estacionari.
2. Aprendre eines de simulació de processos, especialment Matlab i Hysys.
3. Adquirir els coneixements de simulació necessaris per plantejar i resoldre casos paradigmàtics de l'Enginyeria Química, especialment aquells que necessiten eines matemàtiques avançades per a la seva resolució.
4. Aplicar les eines de simulació per predir el comportament de processos.
5. Adquirir els coneixements necessaris per portar a terme anàlisis de sensibilitat de paràmetres mitjançant simulació matemàtica.

### Competències

- Aplicar les tècniques d'anàlisi i síntesi de sistemes a l'enginyeria del procés i del producte.
- Demostrar que es comprenen els principals conceptes del control de processos d'enginyeria química.
- Demostrar que es coneix, a nivell bàsic, l'ús i la programació dels ordinadors, i saber aplicar els recursos informàtics aplicables en enginyeria química.
- Demostrar que es coneixen les diferents operacions de reacció, separació, processament de materials i transport i circulació de fluids involucrades en els processos industrials de l'enginyeria química.
- Hàbits de treball personal

- Treball en equip

## Resultats d'aprenentatge

1. Aplicar els coneixements de reactors i operacions de separació a l'elaboració de models i a la simulació de processos.
2. Aplicar els recursos informàtics de simulació i control de processos.
3. Elaborar models de comportament dinàmic de sistemes compostos per diverses operacions.
4. Treballar cooperativament.
5. Treballar de manera autònoma.
6. Utilitzar la modelització matemàtica de sistemes dinàmics i processos en l'àmbit de l'enginyeria química.

## Continguts

1. Introducció. Eines de simulació.
2. Blocs temàtics:
  - 2.1. Cinètica química
  - 2.2. Sistemes en estat no estacionari.
  - 2.3. Reactors: sistemes no isoterms i modelització i simulació de DTRs.
  - 2.4. Simulació de sistemes complexos amb Hysys.
3. Ajust de paràmetres i anàlisi de sensibilitat.

## Metodologia

La assignatura s'estructura amb tres tipus de sessions:

- Sessions teòriques (1 h) fetes a classe on s'exposaran els casos que seran estudiats a les sessions pràctiques.

- Sessions pràctiques no avaluables (2 h) fetes a les aules d'informàtica, en la qual els alumnes, individualment en el cas dels blocs temàtics 2.1, 2.2 i 2.3 i en grups de dues persones en el cas del bloc 2.4, realitzen algun exemple pràctic de cadascun dels blocs.

- Sessions pràctiques avaluables (2 h) fetes a les aules d'informàtica, en la qual els alumnes, individualment en el cas dels blocs temàtics 2.1, 2.2 i 2.3 i en grups de dues persones en el cas del bloc 2.4, realitzen algun exemple pràctic de cadascun dels blocs. Al finalitzar la sessió, els alumnes entreguen els resultats obtinguts i són avaluats.

## Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes teòriques	8	0,32	1, 3, 6
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Sessió evaluable Bloc 2.1	2	0,08	2, 3, 5

Sessió avaluable Bloc 2.2	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió avaluable Bloc 2.3	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió avaluable Bloc 2.4	2	0,08	1, 3, 4, 6
Sessió no avaluable Bloc 2.1	2	0,08	2, 3, 5
Sessió no avaluable Bloc 2.2	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió no avaluable Bloc 2.3	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Sessió no avaluable Bloc 2.4	2	0,08	1, 2, 3, 4, 6
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Estudi per part dels alumnes	40	1,6	1, 2, 3, 4, 5, 6

## Avaluació

Es divideix en dues parts principals:

- 1) Sessions pràctiques avaluables (avaluació contínua): 15% cadascuna (total: 60%)
- 2) Examen final de síntesi: 40 %

Notes sobre l'avaluació:

- Cadascuna de les parts finals de l'avaluació necessita una nota mínima de 4.0.
- Per accedir a tenir nota de l'avaluació contínua cal fer un mínim de 3 sessions avaluables. En cas contrari, l'alumne tindrà la qualificació de No Presentat.
- L'alumne que no es presenti a l'examen final de síntesi tindrà una qualificació de No Presentat.

## Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Activitat avaluable Bloc 2.1	15	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Activitat avaluable Bloc 2.2	15	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Activitat avaluable Bloc 2.3	15	2	0,08	1, 2, 3, 5, 6
Activitat avaluable Bloc 2.4	15	2	0,08	1, 2, 3, 4, 6
Examen final de síntesi	40	3	0,12	1, 2, 3, 5, 6

## Bibliografia

Manuais i ajudes del programari utilitzat.

Brian H. Hahn, Daniel T. Valentine. Essential Matlab for Engineers and Scientists (Fourth Edition). Elsevier Ltd.

Bibliografia específica de simulació:

Finlayson, B.A., (2006), Introduction to chemical engineering computing. Wiley.

Elnashaie S., Uhlig F., (2007), Numerical Techniques for Chemical and Biological Engineers Using MATLAB. Springer.

Cutlip, M.B., Shacham, M., (2008), Resolución de problemas en Ingeniería Química y Bioquímica con Polymath, Excel y Matlab. Prentice Hall.

Bibliografia específica dels casos considerats:

Scott Fogler, H., "Elements of Chemical Reaction Engineering". 4th ed. (2005).

Scott Fogler, H., "Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas". 4a ed. (2008).

Levenspiel, O., "Chemical reaction engineering". 3rd ed. (1999).

Levenspiel, O., "Ingeniería de las reacciones químicas". 3a ed. (2006).

Missen, R., "Introduction to chemical reaction engineering and kinetics". (1998).